

Nehézfermionos és vegyes valenciájú viselkedés kiterjesztett periodikus Anderson-modellekben

Doktori értekezés tézisei

Hagymási Imre



Készült: MTA Wigner Fizikai Kutatóközpont, Szilárdtestfizikai és Optikai Intézet
Elméleti Szilárdtestfizikai Osztály

Témavezető: Dr. Sólyom Jenő, az MTA rendes tagja, kutatóprofesszor
emeritus

ELTE TTK, Fizika Doktori Iskola
Anyagtudomány és Szilárdtestfizika Program
Iskolavezető: Dr. Palla László, egyetemi tanár
Programvezető: Dr. Lendvai János, egyetemi tanár

Budapest

2014.

Bevezetés

Ce és U tartalmú vegyületekben gyakran fellép az elektronok effektív tömegének anomális (száz vagy ezerszeres) megnövekedése, más vegyületekben pedig a Ce ionok különböző vegyértékével találkozunk. Az előbbi esetben beszélünk nehézfermionos, míg az utóbbiban vegyes valenciájú viselkedésről. A szilárdtest-fizika kezdetben sikeres, elektronok közötti kölcsönhatást nem tartalmazó modelljével ezek az effektusok egyáltalán nem magyarázhatók. Ennek a fő oka, hogy a ritkaföldfém elemek keskeny f nívója a széles vezetési sávba, vagy annak a közepébe is kerülhet. A vezetési és a lokalizált f elektronok keveredése révén nem különböztethetők meg a törzs- és sávelektronok, ami a szilárd testek kényelmes leírását tette lehetővé. Ezen rendszerek leírására született a periodikus Anderson-modell, ami képes az erősen kölcsönható f elektronok és a nem kölcsönható d sávelektronok együttes rendszerét leírni.

Abban az esetben, ha az f nívó a Fermi-szint körül van, akkor nem egész számú elektron helyezkedik el rajta, ilyenkor beszélünk vegyes valenciájú viselkedésről. Az ion vegyértékei között igen kis energiakülönbség van, melynek következtében folyamatosan fluktuál a nívón lévő elektronok száma, így átlagosan, például Mössbauer-spektroszkópiával, azt látjuk, mintha nem egész vegyértékű állapotban lenne.

A nehézfermionos viselkedés esetén az f nívó mélyen a Fermi-szint alatt helyezkedik el, betöltöttsége közel egész és az atomok mágneses momentummal rendelkeznek. Ilyen esetben az alacsony hőmérsékleti elektronfajhő-mérések szerint a Sommerfeld-együttható a fémek szokásos $\text{mJ mol}^{-1} \text{K}^{-2}$ értékénél három nagyságrenddel nagyobb, ugyanez érvényes a Fermi-felületen lévő állapotsűrűsége és az elektronok effektív tömegére is. Ez a növekedés nem tudható be pusztán a sáv szerkezetből adódó effektusnak, hanem az elektronok közötti erős korreláció adja a lényeges járulékot.

Utóbbi időben egyre világosabbá vált, hogy nem minden ritkaföldfém-vegyület viselkedése érthető meg a fenti modell alapján. Ilyen például a Ce-mal adalékolt Nd_2CuO_4 vegyület, amelyben az f elektronok a Cu–O síkokban lévő erősen korrelált elektronokkal keverednek, vagyis a vezetési elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatást is figyelembe kell venni. Egy másik példa arra, hogy a modell kibővítése szükséges, a $\text{CeCu}_2(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_2$ vegyület vizsgálatából adódott. Itt azt találták, hogy a hőmérséklet-nyomás fázisdiagram antiferromágneses kritikus pontjától távol, ahol nem konvencionális szupravezetés jön létre, a nyomás növelésének hatására egy újabb szupravezető tartomány jelenik meg. Ezen fázis megjelenése, csak egy újabb kvantumos kritikus pont megjelenésével magyarázható meg. A kvantumos kritikus pont megjelenése kísérleti eredmények szerint a Ce vegyértékének ugrásszerű változásával hozható kapcsolatba. Azonban ilyen kritikus viselkedést nem találunk a periodikus Anderson-modellben. Ezen probléma orvoslására azt javasolták, hogy figyelembe kell venni a d és f elektronok közötti Coulomb-kölcsönhatást.

Az eddigi irodalmi számolások a periodikus Anderson-modell speciális paramétertartományára vonatkoztak. Nem volt ismert, hogy általános esetben milyen paramétereknél kapunk

Kondo-, illetve vegyes valenciájú viselkedést, valamint, hogy az említett kölcsönhatások miként változtatják meg az ezekben fellépő viselkedést. Az értekezésben az volt a célom, hogy a paraméterek széles tartományában, különböző módszerekkel szisztematikusan megvizsgáljam a felsorolt kölcsönhatások szerepét.

Alkalmazott módszerek

A periodikus Anderson-modell még egy dimenzióban sem oldható meg egzaktul, néhány speciális esetet kivéve, ezért közelítő módszerek alkalmazása szükséges. Perturbációs számítással csak a gyengén kölcsönható határeset tárgyalható, azonban fizikai szempontból nem ez az érdekes. Ezért számos közelítő módszert alkalmaztak a modellre az elmúlt évtizedekben. Az értekezésben átlagtérelmélettel, variációs módszerrel és egzakt diagonalizációval vizsgálom a periodikus Anderson-modellt és kiterjesztett változatait. Az átlagtérelmélet egy szemléletes képet nyújt a modellről, ugyanakkor jelentős elhanyagolásokat kell véghezvinnünk, ami mind az RKKY-kölcsönhatást, mind a Kondo-effektust elhanyagolja. Ezért egy megbízhatóbb módszerrel, a Gutzwiller-féle hullámfüggvényen alapuló variációs számolást is végeztem. Ez a módszer lehetővé teszi a modell vizsgálatát a gyenge és erős csatolású határesetben is. A variációs számolás megbízhatóságát rövid láncokra végzett egzakt diagonalizációval teszteltem.

Tézisek és következtetések

1. A periodikus Anderson-modellre az irodalomban már levezetett variációs egyenletek széles paramétertartományban történő numerikus megoldásával meghatároztam, hogy hol jön létre vegyes valenciájú, illetve Kondo-szerű viselkedés. Kiderült, hogy a szennyező modellel ellentétben sokkal szűkebb tartományban kapunk Kondo-viselkedést, az f nívó energiáját változtatva. Amikor az f nívó betöltöttsége pontosan egységnyi, numerikusan kimutattam, hogy a periodikus Anderson-modell leképezhető a Kondo-rács-modellbe véges Kondo-csatolással.
2. Általánosítottam a variációs számolást a Gutzwiller-hullámfüggvény megfelelő kiterjesztésével úgy, hogy alkalmazható legyen a lokalizált, a vezetési, valamint a vezetési és lokalizált elektronok közötti kölcsönhatások együttes leírására. A variációs hullámfüggvény paramágneses, illetve ferromágneses állapotok leírására is alkalmas.
3. Megvizsgáltam variációs módszerrel, hogy a vezetési elektronok közötti lokális Coulomb-kölcsönhatás milyen effektusokhoz vezet. Alapvetően különböző viselkedés következik be a félig töltött (szigetelő) és nem félig töltött (fém) rendszerben. Félig töltött sáv esetén bekapcsolva az új csatolást, a Kondo-tartomány eltolódik nagyobb f nívó energiák irányába. A kölcsönhatás egy kritikus értékénél, a teljes Kondo-tartományban Brinkman–

Rice-átalakulás következik be, a rendszer Kondo-szigetelőből Mott-szigetelővé alakul. Meghatároztam az átalakulás szükséges és elégséges feltételeit általános esetben. Kevesebb mint félig töltött sáv esetén, a Kondo-tartomány eltolódása sokkal kisebb mértékű, és ekkor nem jön létre Brinkman–Rice-átalakulás. Azonban egy bizonyos csatolási érték fölött stabil közbenső vegyértékű tartomány jelenik meg. Rámutattam, hogy közel félig töltött esetben a vezetési elektronok közötti kölcsönhatás miatt, az f elektronok nehézfermion jellege jelentősen erősödhet. Ha pedig a sáv több mint félig töltött, a Kondo-tartomány akár a vezetési sáv fölé is kerülhet.

4. A vezetési és f elektronok közötti kölcsönhatás szerepét átlagtérelmélet segítségével vizsgálva megmutattam, hogy elsőrendű átalakulás jön létre a csatolás egy kritikus értéke felett, de kvantumos kritikus pont nem jelenik meg.
5. Ugyanerre a modellre a variációs számolással kimutattam, hogy egy kritikus értéknél kvantumos kritikus pont jelenik meg, ahol a vegyérték kritikus fluktuációja lép fel. Részletesen feltérképeztem a kritikus pontnak a modell paramétereitől való függését, és kiderült, hogy a Kondo-viselkedés nem játszik fontos szerepet a kvantumos kritikus viselkedésben. Nagyobb csatolási értékeknél elsőrendű átalakulás jön létre a Kondo- és a másik két egész vegyértékű tartomány között. A csatolást tovább növelve egy újabb kritikus értéknél a Kondo-tartomány teljesen eltűnik és egy hármaspont jelenik meg a rendszerben. Ennél nagyobb csatolás esetén elsőrendű átmenet jön létre a duplán betöltött és üres f nívók között, ilyenkor beszélünk vegyértékkihagyásról. Ez egy másik lehetséges magyarázatát adhatja, a vegyértékkihagyásnak, amit eddig negatív f elektronok közötti kölcsönhatásnak tulajdonítottak.
6. Egzakt diagonalizációval is vizsgáltam a fenti modelleket. Összevetve ezeket az eredményeket a variációs módszerből kapottakkal, meglepően jó egyezést találtam az f nívó betöltöttségét illetően. Kivétel ez alól ha a vezetési, és f elektronok közötti kölcsönhatás is jelen van, ekkor természetesen nem jelenik meg kritikus viselkedés, azonban a Kondo-tartomány szűkülésére, és a vegyes valenciájú tartomány keskenyedésére a variációs számolással megegyező eredményt kapunk. Megvizsgáltam a duplán töltött f rácshelyek számának hibridizációtól való függését, amikor az f nívó betöltöttsége pontosan egy, és azt találtam, hogy a variációs számolásban exponenciális függvény, míg az egzakt diagonalizáció esetében hatványfüggvény alakot kapunk. Erre az a magyarázat, hogy a lánc nagyon kis mérete miatt nem látjuk az exponenciális viselkedést. A vezetési elektronok közötti kölcsönhatás esetén nem jelenik meg Brinkman–Rice-átalakulás a félig töltött modellben, azonban az eltérést az egy-, illetve végtelen dimenziós Hubbard-modell különböző viselkedésével megmagyaráztam.

Publikációs lista

A tézispontok alapjául szolgáló közlemények:

1. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom,
„*Periodic Anderson model with correlated conduction electrons: variational and exact diagonalization study*”
Phys. Rev. B **85**, 235116 (2012).
2. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom,
„*Periodic Anderson model with d-f interaction*”
Acta Phys. Pol. A **121**, (2012).
3. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom,
„*Quantum criticality and first-order transitions in the extended periodic Anderson model*”
Phys. Rev. B **87**, 125146 (2013).
4. I. Hagymási, K. Itai, J. Sólyom,
„*Hubbard physics in the symmetric half-filled periodic Anderson-Hubbard model*”
J. Kor. Phys. Soc. **62**, 1423 (2013).